



TITLE:

層状化合物 $\text{TiCl}_3$ の格子振動について(大阪大学 基礎工学部 物性物理学教室,修士論文アブストラクト 1978年度)

AUTHOR(S):

杉目, 高

---

CITATION:

杉目, 高. 層状化合物 $\text{TiCl}_3$ の格子振動について(大阪大学 基礎工学部 物性物理学教室,修士論文アブストラクト 1978年度). 物性研究 1979, 32(3): 247-248

ISSUE DATE:

1979-06-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89795>

RIGHT:

調べた。

(i) 石英棒に円筒状に真空蒸着した鉛及び錫を、超伝導転移温度以下の一定温度に保ち、ピックアップコイル中を通過させたところ、600 Å 以下の膜厚では磁束の変化による信号は検出されなかった。それ以上の膜厚の試料では、バルクとは異なり、コイル通過に際し、相異なる向きの二つの電圧ピークが連続して現われた。この奇妙なピークは、小さなコイルを用いた模型実験により、磁束が膜面に垂直に凍結されたためと判明した。

(ii) 通常のビスマスは砒素型構造をもった半金属であり、超伝導体ではないが、低温蒸着した非晶質ビスマスは超伝導を示す。本実験では、低温蒸着ビスマス薄膜及び鉛薄膜について、弱磁場中での磁化の温度変化を調べるため、蒸着直後より磁化測定の可能なクライオスタットを製作し、測定した。その結果、磁化の温度変化曲線は、薄膜中に含まれ、磁束凍結をする欠陥の性質を反映していることが明らかになった。

## 層状化合物 $\text{TiCl}_3$ の格子振動について

杉 目 高

$\text{TiCl}_3$  は層状物質で、蜂の巣格子を作っている Titanium 面と、三角格子を作っている 2 枚の Chlorine 面が、Cl-Ti-Cl の順に並んで 1 つのサンドウィッチ構造を形成している。

このような層状構造を有する  $\text{TiCl}_3$  について Phonon Dispersion を計算した。Chlorine ion の polarization 効果を取り入れる為に Shell Model を用いた。Titanium ion は、rigid ion として扱った。

短距離型の Repulsive Force は、Shell を通してのみ作用すると近似した。パラメータは、Repulsive Potential の 1 階微分に関係した  $B_1 \sim B_7$ 、2 階微分に関係した  $A_1 \sim A_7$ 、shell charge, shell-core 間の force constant の 16 個である。

このうち、 $B_1 \sim B_7$  は結晶の平衡条件より決定した。他のパラメータは、Emeis らによって観測された Far-Infrared spectrum の  $\Gamma$  点の Au-mode, Eu-mode の frequency に合う様に選んだ。この model では、u-mode に属する高い frequency の値を再現するのは無理であった。

しかし、低い frequency の Ag-mode, Eg-mode に関しては、 $\text{ScCl}_3$  の Raman spectrum と良い一致が得られた。なお、上記のように決めたパラメータを用いて、phonon Dispersion を計算した。

## 「 $\text{TiSe}_2$ の電子状態と格子の不安定性」

吉 田 幸 正

層状物質  $\text{TiSe}_2$  は  $T \simeq 200\text{ K}$  以下でもとの格子の 2 倍の周期をもつ超格子の生成を伴う構造相転移を起こす。伝導率、光電子放出等の実験で free carrier の存在が報告され、A. Zunger らの selfconsistent なエネルギーバンドの計算によると  $P$  点付近に正孔、 $L$  点付近に電子をもつ半金属である事がわかった。このため  $\text{TiSe}_2$  における構造相転移は  $P$  点付近のフェルミ面と  $L$  点付近のフェルミ面との nesting によるものではないかという説が出ている。

しかし、フェルミ面があまりにも小さい事、超格子の周期がもとの格子のちょうど 2 倍である事から  $\text{TiSe}_2$  の場合には格子変形を特徴づける  $\vec{q}$  を決定しているのは nesting モデルのようにフェルミ面の形状ではなく、電子格子相互作用の  $\vec{q}$ -依存性が本質的なのではないかと思われる。

そこで我々は電子格子相互作用の  $\vec{q}$ -依存性を explicit に調べるため tight-binding 近似で LCAO 法を用い A. Zunger らによって得られたエネルギーバンドを再現した。このバンドをもとに、まず、電子格子相互作用の  $\vec{q}$ -依存性を落とした bare susceptibility  $\bar{\chi}_{\vec{q}}$  を計算した。

結果は  $\bar{\chi}_{\vec{q}}$  は  $L$  点付近で broad な山をもつが  $M$  点との差はわずかであり、この事から  $L$  点に相当する格子変形が安定であるとは決定的には言い難い。

さらに電子格子相互作用の  $\vec{q}$  依存性を含めた  $\chi_{\vec{q}}$  を計算するために必要な電子格子相互作用係数を求めた。